Молекулярные орбитали и принцип квантовой суперпозиции.

Безверхний Владимир Дмитриевич.

Украина, e-mail: bezvold@ukr.net

Обратим внимание, что энергия исходных атомных орбиталей и энергия образованных молекулярных орбиталей отличаются. Вот именно поэтому, молекулярные орбитали противоречат квантовой механике.

Вспомним химию. По методу молекулярных орбиталей волновую функцию представляют линейной комбинацией перекрывающихся атомных орбиталей:

$\psi = C1\psi1 + C2\psi2$

где $\psi1$, $\psi2$ — волновые функции атомных орбиталей.

Далее, рассмотрим два квантовых состояния (реально существующие), описываемые волновыми функциями $\psi1$ и $\psi2$. Из принципа квантовой суперпозиции следует, что линейная комбинация ($\psi3 = C1\psi1 + C2\psi2$) будет третьим квантовым состоянием (реально существующим), которое будет описываться волновой функцией $\psi3$.

Значит, измерение некоторой физической величины E в состоянии $|\psi1>$ даст E1, а измерение E в состоянии $|\psi2>$ даст E2.

При измерении E в третьем квантовом состоянии $|\psi3>$ квантовая система будет принимать иногда значение E1, а иногда значение E2 (с определенной частотой). То есть, в третьем квантовом состоянии ($\psi3 = C1\psi1 + C2\psi2$) у нас будет дискретный набор значений физической величины.

А это значит, что молекулярные орбитали не смогут иметь энергию отличающуюся от исходных атомных орбиталей.

Фактически, классическое определение молекулярных орбиталей противоречит принципу квантовой суперпозиции, то есть, оно ошибочно.

Принцип квантовой суперпозиции:

"...Пусть в состоянии с волновой функцией $\psi1(q)$ некоторое измерение приводит с достоверностью к определенному результату - результат 1, а в состоянии $\psi2(q)$ - к результату 2. Тогда принимается, что всякая функция вида $C1\psi1 + C2\psi2$ (C1, C2 - постоянные), описывает состояние, в котором то же измерение даст либо результат 1, либо результат 2...

Эти утверждения составляют содержание так называемого принципа суперпозиции состояний - основного положительного принципа квантовой механики. Из него следует, в частности, что все уравнения, которым удовлетворяют волновые функции, должны быть линейными по ψ..." (Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика в 10 томах. Том 3. Квантовая механика. Четвертое издание. М.: Наука, 1989, стр. 20 - 21).